



TITLE:

相転移に伴う固体における欠陥発生
の研究(修士論文(2004年度))

AUTHOR(S):

南, 暁彦

CITATION:

南, 暁彦. 相転移に伴う固体における欠陥発生の研究(修士論文(2004年度)). 物性研究 2005, 84(4): 672-701

ISSUE DATE:

2005-07-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/110250>

RIGHT:

修士論文 (2004年度)

相転移に伴う固体における欠陥発生の研究*

京都大学大学院理学研究科 南 暁彦[†]

概要

固体における欠陥構造の中でも特に、非線形領域での弾性効果が現れる2相合金の相分離過程における欠陥の発生機構の解明や、大変形に対する2相合金の弾性的な応答についての研究を行った。格子定数の違いが顕著な二種の金属を混合した場合、界面付近で格子定数の違いを補い切れずに欠陥が発生しやすい。こうしてできた界面のことを不整合な界面と言ひ、格子が界面で連続な場合を整合な界面と言う。深くクエンチした系における弾性場は、結晶の不整合な界面をはじめとする欠陥構造の現れる格好の題材である上、殆んど未開拓な領域である。さらに、理論的考察がなされていたとしても、それは分子動力学を用いたものか、静的な弾性場を仮定した方法であるため、Phase field modelで相分離と弾性場双方のダイナミクスにまで踏み込むことは今までできなかった。当研究では非線形な弾性理論であるFrenkel-Kontorovaモデルを2次元または3次元に拡張したモデルを採用し、それに加えて転位と金属の成分との双方の相互作用を解明したという点で今までにない特色を持っている。伝統的な線形な弾性モデルを非線形に拡張した上で数値計算を行い、転位と金属の成分との相互作用について以下のような結論を得た。

まず、共存線よりも若干下に浅いクエンチをし、整合な界面を持った、2相合金に特徴的なドメイン構造を作り、そこで更に深いクエンチをすることで相分離が進行し、その結果自発的に整合な界面から不整合な界面へと移り変わることを確認した。その際、転位は必ずペアで発生し、結晶のすべり面は必ず2相のうち軟らかい方に優先的に進展することも確認された。この自発的な転位の発生は、従来の線形理論や転位の理論では簡潔に記述できない現象で、当研究で初めて再現された成果である。

通常の1相合金では弾性変形領域以上の変形を加えると、降伏点と呼ばれる点を境に極端に応答が減少し、その後塑性変形する。一方、2相合金の場合は結晶のすべりが、析出している硬い結晶の相の境界ですべりの進行が妨げられ、明確な降伏点が現れず、弾性応答は変形していくにつれ増加し続ける。この効果は工学的に重要で、以前から良く知られていた結果であったが、今回用いた理論形式で非常によく再現されることを確認した。

3次元での理論にも少し言及する。3次元ではエネルギー的な要請から転位は点状ではなく、線状を取る。通常線状の欠陥は境界から発生し、また別の境界で留まるか、ループを形成することでエネルギー的に準安定な状態を取ろうとする。このような現象を当論文の枠組で美しく再現されることを確認した。

*本論文では一部カラーの画像があるが、これらの動画やPDFに焼き直したファイルが私のページ <http://stat.scphys.kyoto-u.ac.jp/~minami.a/> からダウンロードできるので、不明瞭な場合はそちらを参照のこと。

[†]E-mail: minami.a@scphys.kyoto-u.ac.jp

目 次

| | | |
|----------|-----------------------------------|-----|
| 1 | イントロダクション | 674 |
| 1.1 | 合金の相分離 (整合な界面の場合) | 674 |
| 1.2 | Bragg-Williams Theory と保存系のダイナミクス | 674 |
| 1.2.1 | Bragg-Williams Theory | 674 |
| 1.2.2 | Cahn-Hilliard 方程式 (Model B) | 675 |
| 1.3 | Cahn の理論 | 676 |
| 1.3.1 | 線形弾性理論 | 676 |
| 1.3.2 | 変形テンソルの書き換え (等方弾性場の場合) | 677 |
| 1.3.3 | 回転変換と対称性 | 677 |
| 1.3.4 | 変形テンソルの書き換え (4 回対称性のある弾性場の場合) | 677 |
| 1.3.5 | Cahn の理論 | 678 |
| 1.4 | 弾性不均一性 | 679 |
| 1.5 | 界面の構造 | 679 |
| 2 | モデル (2 次元) | 680 |
| 2.1 | 正方格子における非線形弾性理論 | 680 |
| 2.2 | 自由エネルギーと運動方程式 | 681 |
| 2.2.1 | 自由エネルギー | 681 |
| 2.2.2 | 全エネルギーの時間発展 | 683 |
| 2.2.3 | 線形弾性理論より得られる知見 | 683 |
| 3 | 数値計算 (2 次元) | 683 |
| 3.1 | 数値計算手法 | 683 |
| 3.1.1 | 無次元化 | 683 |
| 3.1.2 | 微分演算の詳細 | 684 |
| 3.2 | 欠陥の下での相分離ダイナミクス (Cottrell 雰囲気) | 684 |
| 3.3 | 硬いドメイン周りの欠陥生成 | 686 |
| 3.4 | ネットワーク構造における欠陥生成 | 688 |
| 3.5 | 2 相状態での変形 | 689 |
| 4 | モデル (3 次元) | 691 |
| 4.1 | 非線形弾性エネルギー | 691 |
| 4.1.1 | 歪み成分 | 691 |
| 4.1.2 | 弾性エネルギー | 692 |
| 4.2 | 2 相合金におけるダイナミクス | 694 |
| 5 | 数値計算 (3 次元) | 695 |
| 5.1 | 硬いドメイン周りの欠陥生成 | 696 |
| 5.1.1 | 一様剪断変形に伴う欠陥発生 | 696 |
| 5.1.2 | 一様伸長に伴う欠陥発生 | 697 |

| | | |
|-----|-----|-----|
| 6 | まとめ | 699 |
| 6.1 | 結論 | 699 |
| 6.2 | 謝辞 | 700 |

1 イントロダクション

1.1 合金の相分離 (整合な界面の場合)

合金は工学的見地からも物理学的見地からも重要な研究対象である。金属を始めとする固体は応用上大変形に対して硬いことが要求され、硬さを向上させる方法の一つに、二種の異なる金属を混ぜ合わせる方法がある。合金の硬化機構は既に工学的にも十分研究されているが、何故敢えてここでもう一度この問題を提起するかは後程述べる。一方物理学的にも合金は非常に興味深い研究対象で、転移点より温度を下に設定したとき、ミクロな **Modulated Pattern** と呼ばれる金属に特徴的なパターンを形成し、マクロな大きさの相分離は実現されない (図 1)。また、ミクロなドメインは結晶の対称性を反映した、角形のもの良く観察される。この現象は特にニッケルをベースとした合金において顕著で、中でも Ni-Al 合金は最も特徴的である。

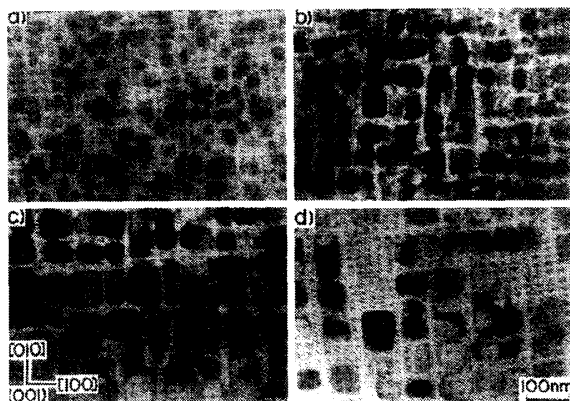


図 1: Ni_4Mo の析出。973K で (a) 12.8×10^3 秒間、(b) 864×10^3 秒間、(c) 2.6×10^6 秒間、(d) 5.2×10^6 秒間静置した際の時間発展 [1]。

合金の相分離に関しては古くは Bragg と Williams による研究 [2] に遡り、Cahn と Hilliard によるダイナミクス of 記述、Cahn による弾性場を採り入れた相分離の研究 [3] を経て、最近では小貫・西森らによるパターン形成の研究 [4, 5] などが為されている。以後、これらの歴史的経緯を追いかけると共に、現在まであまり手の付けられていなかった問題点を簡単に列挙していくことにする。

1.2 Bragg-Williams Theory と保存系のダイナミクス

1.2.1 Bragg-Williams Theory

合金の相分離の研究は Bragg と Williams による相分離の研究 [2] に端を発する。ある適当な大きさを持ち、その内部に Ω 個の格子点を持つ格子を考え、二種類の金属 AB の総粒子数がそれぞれ N_A , N_B で、これが Ω 個の格子点全体に万遍無く充填している状況を考える。今、ある格子点で金

属 A が存在する確率を c_A 、金属 B が存在する確率を c_B とする。この定義から $c_A + c_B = 1$ であることは前提として押えておかねばならない。この系における秩序パラメータ ψ は以下のように定義される。

$$\psi = c_A - c_B \quad (1)$$

隣り合う金属との相互作用として、隣と同種の金属のときエネルギーは J だけ下がり、異種の金属のとき J だけ上がるようにエネルギーの基準を取る。隣り合う金属が同種の確率はおおよそ $c_A^2 + c_B^2$ で、異種の確率は $2c_A c_B$ と考えられるので、相互作用によるエネルギーは最接粒子数を z として

$$E = -\frac{1}{2}zJ\Omega [c_A^2 + c_B^2 - 2c_A c_B] = -\frac{1}{2}zJ\Omega\psi^2 \quad (2)$$

と秩序パラメータ ψ のみで書き下すことができる。これにより分配関数は

$$Z = \frac{\Omega!}{N_A!N_B!} \exp \left[\frac{\beta\Omega zJ}{2} \psi^2 \right] \quad (3)$$

となり、自由エネルギー密度は **Stirling の公式** $\ln N! \approx N \ln N - N$ を用いて

$$\begin{aligned} \frac{v_0}{k_B T} f_{BW}(\psi) &= \frac{1}{k_B T \Omega} \ln Z \\ &= \frac{1+\psi}{2} \ln(1+\psi) + \frac{1-\psi}{2} \ln(1-\psi) - \frac{zJ}{2k_B T} \psi^2 \end{aligned} \quad (4)$$

と書き下すことができる。但し v_0 は単位格子の体積である。ところでこの式は $|\psi| \ll 1$ の極限で **Landau 展開**と同様の

$$v_0 f_{BW}(\psi) = \frac{1}{2}(k_B T - zJ)\psi^2 + \frac{k_B T}{12}\psi^4 + \dots \quad (5)$$

という形を内包している。これにより、臨界温度 $T_0 = zJ$ であることが分かるが、この論文では強く相分離した系を扱うのでこの展開は用いず、(4) 式の形のまま扱うこととする。(4) 式は $\psi = \pm 1$ で発散するが、 $\psi = \pm 1$ の極限は A 金属もしくは B 金属の一方だけが十分多く、他方が十分少ない極限であるため、このような領域では Stirling の公式を適用すること自体が間違いであることに注意せねばならない。本論文では Landau 展開の適用範囲は越えるが Stirling の公式の適用範囲内におさまるような領域を扱う。これに更に勾配の項を加えることで、系全体の自由エネルギー汎関数は

$$\mathcal{F}_{BW} = \int d\mathbf{r} \left[f_{BW}(\psi) + \frac{C}{2} |\nabla\psi|^2 \right] \quad (6)$$

と与えられる。

1.2.2 Cahn-Hilliard 方程式 (Model B)

Cahn と Hilliard によって導かれた Cahn-Hilliard 方程式に関して説明する。合金中では金属の総量および成分比が保存されるため、単純な保存則

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (7)$$

が成立する。ここで J は金属粒子の流束である。この流束は、化学ポテンシャルの違いによって駆動されるので、適当な輸送係数を $\lambda(\psi)$ として以下のように与えられる。

$$J = \lambda(\psi) \nabla \mu \quad (8)$$

$$\mu = \frac{\delta \mathcal{F}_{\text{BW}}}{\delta \psi} \quad (9)$$

これらの式を組み合わせることで ψ に関して完結した式

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \nabla \cdot \lambda(\psi) \nabla \frac{\delta \mathcal{F}_{\text{BW}}}{\delta \psi} \quad (10)$$

が得られる。これが **Cahn-Hilliard 方程式 (Model B)** である。これを適当な計算スキームに代入して計算すれば時間発展を計算できるが、この形式では当初金属の相分離で現れるとしたミクロ相分離は実現されないことが分かっている。

ミクロ相分離の機構について最初に考察を行ったのは Cahn である。

1.3 Cahn の理論

合金の相分離金属の格子の上で行われるため、必然的に格子による弾性相互作用と結合している。このことを積極的に初めて採り入れたのは Cahn である [3]。Cahn の理論では、二種類の合金を構成している原子の半径の大きさの違いを採り入れ、格子定数の違いを補正するように弾性場が変形するように弾性場との結合項を採り入れた。

1.3.1 線形弾性理論

弾性場との結合の議論に入る前に、線形な弾性場と回転対称性に関して議論をしておく。空間上の点 \mathbf{r} について、その点における弾性体の変位を $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ とすると、変形テンソルは

$$\varepsilon_{ij} = \nabla_i u_j + \nabla_j u_i \quad (11)$$

このトレース部分

$$e_1 = \frac{1}{2} \varepsilon_{ii} = \nabla \cdot \mathbf{u} \quad (12)$$

は局所的な体積変形を表す。変形は局所的な体積変形と剪断変形その他に分類することができるので、(11) を

$$\varepsilon_{ij} = \left(\nabla_i u_j + \nabla_j u_i - \frac{2}{d} \nabla \cdot \mathbf{u} \delta_{ij} \right) + \frac{2}{d} \nabla \cdot \mathbf{u} \delta_{ij} \quad (13)$$

と分離してやる。第一項は体積変形を除いた部分の変形で、第二項は体積変形のみの変形を表す。そこで第一項を新たに

$$e_{ij} = \nabla_i u_j + \nabla_j u_i - \frac{2}{d} \nabla \cdot \mathbf{u} \delta_{ij} \quad (14)$$

と書く。線形弾性理論ではこの変形に関して二次まで取るので、弾性エネルギーは

$$\mathcal{F}_{\text{el}} = \int d\mathbf{r} \left[\frac{1}{2} C_{ijkl} e_{ij} e_{kl} + \frac{1}{2} K e_1^2 \right] \quad (15)$$

と書かれる。ここで C_{ijkl} は四階のテンソルで、空間の対称性に依ってその形を変える。

1.3.2 変形テンソルの書き換え (等方弾性場の場合)

如何なる回転変換に対しても不変な弾性場の場合、(15) は

$$\mathcal{F}_{el} = \int d\mathbf{r} \left[\frac{1}{2} \mu e_{ij}^2 + \frac{1}{2} K e_1^2 \right] \quad (16)$$

と書くことができるが、これは物理的に分かりやすい形に書き換えることが可能で、特に2次元では

$$\mathcal{F}_{el} = \int d\mathbf{r} \left[\frac{1}{2} \mu \{ (\nabla_x u_x - \nabla_y u_y)^2 + (\nabla_x u_y + \nabla_y u_x)^2 \} + \frac{1}{2} K e_1^2 \right] \quad (17)$$

{ } 中の第一項は一軸的に伸び縮みするときに値を持つ項で、第二項は剪断変形をするときに値を持つ項である。これらは直感的に分かりやすい上に記述が簡便にという理由から改めて以下のように書く。

$$e_2 = \nabla_x u_x - \nabla_y u_y \quad (18a)$$

$$e_3 = \nabla_y u_x + \nabla_x u_y \quad (18b)$$

1.3.3 回転変換と対称性

回転変換に対する群論的対称性を議論する。ここで言う回転変換とは、系を固定し、ある原点に対して観測している自分の座標を θ だけ回転することである。つまり、空間上のベクトルは以下の回転行列により変換される。

$$R(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (19)$$

この変換により、ベクトルは $\mathbf{a}' = R(\theta)\mathbf{a}$ と変換される。一方、局所変形を表す (18) は

$$e'_1 = e_1 \quad (20a)$$

$$e'_2 = e_2 \cos 2\theta + e_3 \sin 2\theta \quad (20b)$$

$$e'_3 = e_3 \cos 2\theta - e_2 \sin 2\theta \quad (20c)$$

と変換される。

若干話は異なるが、これらの歪み成分は **Compatibility Relation** という関係式を満たす。

$$\nabla^2 e_1 = (\nabla_x^2 - \nabla_y^2) e_2 + 2\nabla_x \nabla_y e_3 \quad (21)$$

これは変数を消去したり、変数に対する拘束条件となったりして弾性場の時間発展に関して非常に重要な関係式となる。

1.3.4 変形テンソルの書き換え (4 回対称性のある弾性場の場合)

$\pi/2$ の対称性のある場では (20) において $\theta = \pi/2$ とすることによって歪み成分は

$$e'_1 = e_1 \quad (22a)$$

$$e'_2 = -e_2 \quad (22b)$$

$$e'_3 = -e_3 \quad (22c)$$

と変換される。この変換に対して不変である弾性エネルギーは以下のように書くことができる。

$$\mathcal{F}_{\text{el}} = \int d\mathbf{r} \left[\frac{1}{2} K e_1^2 + \frac{1}{2} \mu_2 e_2^2 + \frac{1}{2} \mu_3 e_3^2 \right] \quad (23)$$

これが4回対称性のある場における線形弾性エネルギーである。これと同様の手続きで三角格子のような弾性場も書き下すことができる。

1.3.5 Cahn の理論

格子定数の小さい成分が多く存在するときに秩序変数 ψ が正であるとする。格子定数の小さい原子が存在するとき、格子定数の大きさに合わせてその領域が局所的に圧縮される。また逆に大きい原子が存在するときは局所的に膨張すると考えられる。つまり、秩序変数が正の領域は圧縮、負の領域は膨張する。このことから秩序変数は圧縮膨張を表す歪み成分 e_1 と結合していると考えられる。[4]に従って、結合項 $f_c(\mathbf{u}, \psi)$ をここでは

$$f_c(\mathbf{u}, \psi) = \alpha e_1 \psi \quad (24)$$

と書く。実際、 e_1 についてのみ極小点を求めると

$$e_1 = -\frac{\alpha\psi}{K} \quad (25)$$

となり、成分比に依存して圧縮膨張が起きること表す項であることが分かる。これを Vegard 則と言う。

以上の考察に基づいて、自由エネルギーを書き下すと以下ようになる。

$$\mathcal{F} = \int d\mathbf{r} [f_{\text{BW}}(\psi) + f_{\text{el}}(\mathbf{u}) + \alpha e_1 \psi] \quad (26)$$

また、これを元にした時間発展方程式を以下に列挙する。

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \nabla \cdot \lambda(\psi) \nabla \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \psi} \quad (27a)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \mathbf{v} \quad (27b)$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mathbf{u}} + \eta \nabla^2 \mathbf{v} \quad (27c)$$

弾性場は音速程度の時間スケールで伝播するのに対して、金属の成分はそれよりはるかに長い時間をかけて拡散をすることから、秩序変数のタイムスケールでは殆ど弾性場は平衡に達していると考えられる。つまり、秩序変数の時間発展に伴い、常に

$$\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mathbf{u}} = 0 \quad (28)$$

が実現されていると予想される。Cahn は現在用いている弾性理論が線形であることに着目し、(28)を解析的に解いた。しかしながら、線形弾性場を消去することによって得られた方程式は、単純に臨界温度が下がっているだけで、長い時間スケールでのドメインのピン止めは実現されなかった。

1.4 弾性不均一性

以上の理論結果を踏まえ、西森、小貫、古川は [4, 5, 6] 格子定数の違いの他に、二つの成分間の硬さの違いを考慮にいたした理論を構築した。つまり一軸弾性定数と剪断弾性定数が成分比に依存して変化することに着目し

$$\mu_2 = \mu_{20} + \mu_{21}\psi \quad (29a)$$

$$\mu_3 = \mu_{30} + \mu_{31}\psi \quad (29b)$$

とおいた上で弾性場を消去した。その結果、自由エネルギーには単純な Bragg-Williams 理論に対して以下の補正が入ることが判明した。

$$\begin{aligned} \Delta\mathcal{F} = & \int d\mathbf{r} \left[-\frac{\alpha^2}{2L_0}\psi^2 + \frac{\tau_{\text{cub}}}{2} |\nabla_x \nabla_y w|^2 \right] \\ & + \int d\mathbf{r} \left[g_2 \psi |(\nabla_x^2 - \nabla_y^2)w|^2 + g_3 \psi |\nabla_x \nabla_y w|^2 \right] \end{aligned} \quad (30)$$

ここで w は以下の Laplace 方程式で与えられる解である。

$$\nabla^2 w = \psi - \langle \psi \rangle \quad (31)$$

第一項分母は $L_0 = K + \mu_{20}$ と定義されていて、Cahn の理論を紹介した際に臨界温度を下げたという項である。第二項の τ_{cub} は以下のように定義されている。 $\tau_{\text{cub}} = -2\alpha^2 \mu_{20} \xi_a / L_0^2$ で、 $\xi_a = 2(\mu_{20} - \mu_{30} - 1)$ と定義されている弾性的異方性を表す要素である。また、第三項と第四項の g_2 と g_3 は $g_2 = \mu_{21}\alpha^2 / 2L_0^2$ 、 $g_3 = 2\mu_{31}\alpha^2 / L_0^2$ と定義されている項である。この項がドメイン成長をピン止める効果を持つ。

1.5 界面の構造

実際の物質の界面の構造は以上の理論で記述されるものよりずっと複雑である。というのも、2 相合金の二つの金属成分の格子定数が大きく異なる場合、界面付近では格子定数の差を補うために大きく変形をする。その変形がある臨界値を越えると結晶格子が連続につながらない不整合な界面構造が発生する。

今回の修士論文で発表するのは 2 次元に関しては以下のトピックを扱う。

1. 欠陥構造が相分離に果たす役割 (Subsection 3.2)
2. 界面における欠陥構造の発現機構 (Subsection 3.3, Subsection 3.4)
3. 2 相合金における塑性変形 (Subsection 3.5)

2 次元では欠陥構造は点として現れるが、実際の物質である 3 次元固体では線欠陥である。その線欠陥がループを形成したり絡まり合うことで 2 次元の場合とは異なる力学的応答や相分離のダイナミクスが期待される。そのモデルの詳細と、それに関する簡単な数値計算の結果を以下のセクションで説明する。

1. 3 次元モデルの詳細 (Subsection 4.1)
2. 2 相状態下での塑性変形と欠陥ループの生成 (Subsection 5.1)

2 モデル(2次元)

相分離過程での自発的転位の発現を扱うには、微小変形しか許さない従来の線形弾性理論では十分に扱えない。もちろんそれを扱った論文も存在する [7, 8]。しかしこれらは解析的に計算された転位の周囲の変形の解を濃度場に組み込んだり、転位を特異性として扱い、それを Fourier 変換して濃度場に組み込む事で、転位のダイナミクスの複雑さに踏み込む事を避けている。しかし自発的な転位の生成に関する問題は以上の手続きでは取り扱う事ができないため、転位が発生する程度の大きな変形を許す非線形な弾性理論を構築する必要に迫られる。

2.1 正方格子における非線形弾性理論

弾性項に転位が発生する程度の非線形性を与えるためには以下の要請を採り入れなければならない。

1. 結晶の対称性に厳密であること
2. 結晶の周期性を反映すること
3. 微小変形の極限で線形弾性理論に一致せねばならないこと

要請 (1) は式 (20) より簡単に考察できる。正方格子では $\pi/2$ の回転に対して不変でなければならないが、 $\theta = \pi/2$ ではこれらは

$$e'_1 = e_1 \quad (32a)$$

$$e'_2 = -e_2 \quad (32b)$$

$$e'_3 = -e_3 \quad (32c)$$

と変換される。

結晶の周期性は以下のように考える。今 e_3 は局所的な剪断変形を表すが、剪断が 1 格子分与えられた時、粒子は隣の格子点に移ると考えられる。そこで、自由エネルギーのうち e_3 の寄与する部分は 1 の周期をもたねばならない。同様に e_2 も 1 の周期を持つと考えられる¹。また e_1 は局所的な圧縮膨張を表すので周期性には関与しない。

以上の考察と、微小極限で線形理論、つまり 2 次形式になることを要請すれば弾性エネルギーは以下のように書かれる。

$$\mathcal{F}_{el} = \int d\mathbf{r} \left[\frac{K}{2} e_1^2 + \Phi(e_2, e_3, \psi) \right] \quad (33)$$

$$\Phi(e_2, e_3, \psi) = \frac{\mu_2}{(2\pi)^2} (1 - \cos 2\pi e_2) + \frac{\mu_3}{(2\pi)^2} (1 - \cos 2\pi e_3) \quad (34)$$

これが以上の要請を全て満たすことは容易に確かめられる。また、当然 2 相合金においては以下の様に成分比に依存した弾性定数を適用せねばならない。

$$\mu_2 = \mu_{20} + \mu_{21}\psi \quad (35a)$$

$$\mu_3 = \mu_{30} + \mu_{31}\psi \quad (35b)$$

¹ e_2 はすべりとして発現する際、斜め 45 度方向のすべりとして現れる。今正方格子を仮定しているので厳密に考えるのであれば $\sqrt{2}$ の周期を持たねばならないが、ここでは [9] に従い周期を 1 とする。これによって欠陥発生の詳細は異なる

力学的安定性を簡単に吟味することができる。力学的に安定であるためには、ポテンシャルエネルギーは変位の二階微分をとった場合正でなければならない。つまり変形 e_2, e_3 に関する二階微分が

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial e_2^2} = \mu_2 \sin 2\pi e_2 > 0 \quad (36a)$$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial e_3^2} = \mu_3 \sin 2\pi e_3 > 0 \quad (36b)$$

を満たさねばならない。言い換えるならば

$$|e_2 - n| < 1/4 \quad (37a)$$

$$|e_3 - m| < 1/4 \quad (37b)$$

という領域が力学的に安定な領域である。但し n, m は整数である。これをプロットしたのが図2である。実線が力学的に安定な領域、破線が不安定な領域を表す。

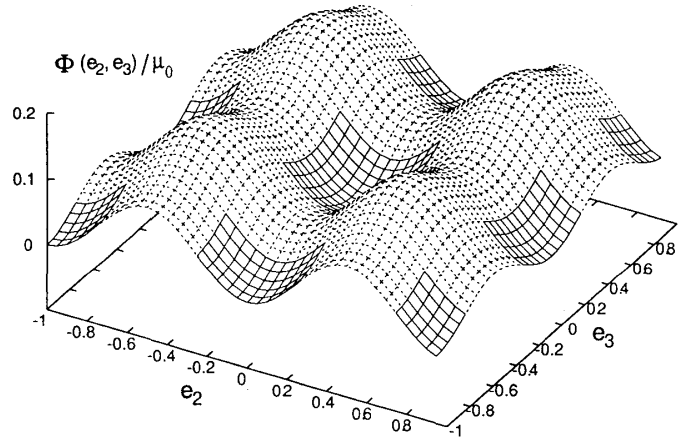


図 2: μ_2 で規格化されたスケールで見た $\Phi(e_2, e_3, \psi)$ 。実線部分は力学的に安定な領域、破線部分は不安定な領域を表す。周期的に存在する谷底の安定領域が 1 格子単位での変形を表す。

2.2 自由エネルギーと運動方程式

2.2.1 自由エネルギー

自由エネルギーは式(26)と同様で

$$\mathcal{F} = \int d\mathbf{r} [f_{\text{BW}}(\psi) + f_{\text{el}}(\mathbf{u}) + \alpha e_1 \psi] \quad (38)$$

と書かれるが、弾性エネルギーの部分は非線形性を導入する。これに基づくとストレステンソルは以下のように定義される。

$$-\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mathbf{u}} = \nabla \cdot \vec{\sigma} \quad (39)$$

これに基づけばストレステンソルは

$$\sigma_{xx} = Ke_1 + \alpha\psi + \frac{\mu_2}{2\pi} \sin 2\pi e_2 \quad (40a)$$

$$\sigma_{yy} = Ke_1 + \alpha\psi - \frac{\mu_2}{2\pi} \sin 2\pi e_2 \quad (40b)$$

$$\sigma_{xy} = \sigma_{yx} = \frac{\mu_3}{2\pi} \sin 2\pi e_3 \quad (40c)$$

と書ける。運動方程式は (27) と全く同様であるが、まず弾性場に関して詳しく説明する。

上述のストレステンソルを用いれば、運動方程式は以下のように書かれる。

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \nabla \cdot \vec{\sigma} + \eta_0 \nabla^2 \mathbf{v} \quad (41a)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \mathbf{v} \quad (41b)$$

ここで η_0 は音波の吸収を表す剪断粘性係数で、この項が平衡状態へと導く。また、バルク粘性の項 ($\nabla \cdot \mathbf{v}$ に比例する項) は簡単のため無視した。

一方、濃度場の基礎方程式は以下のようにした。

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \nabla \cdot L_0 (1 - \psi^2) \nabla \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \psi} \quad (42)$$

拡散係数 $\lambda(\psi)$ が $\lambda_0(1 - \psi^2)$ という形をしているのはこの式の具体的な形式を見れば明らかである。化学ポテンシャルの項 $\delta \mathcal{F} / \delta \psi$ は具体的には

$$\begin{aligned} \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \psi} = & \frac{k_B}{v_0} \left[\frac{T}{2} \ln \left(\frac{1+\psi}{1-\psi} \right) - T_0 \psi \right] \\ & - C \nabla^2 \psi + \alpha e_1 + \frac{\mu_{21}}{4\pi^2} [1 - \cos(2\pi e_2)] + \frac{\mu_{31}}{4\pi^2} [1 - \cos(2\pi e_3)] \end{aligned} \quad (43)$$

と書かれる。後ろの二項は弾性的不均一性に由来する項である。さて、拡散係数の形式の由来であるが、運動方程式 (42) は AB 合金の片一方の金属の希薄極限ではたっぷりあるもう一方の金属の濃度場の中を拡散するため、単純な拡散方程式に従う事が要求される。実際 A 金属の濃度を c_A 、B 金属の濃度を c_B とすると、希薄極限つまり $\psi \rightarrow \pm 1$ の極限では $\partial c_{A \text{ or } B} / \partial t = D_0 \nabla^2 c_{A \text{ or } B}$ となる。但し拡散定数 D_0 は $D_0 = \lambda_0 k_B T / v_0$ である。通常金属では拡散にかかる時間が弾性場の伝搬と比較してはるかに長い。実際弾性場は音速程度のスケールで時間発展するのに対し、金属の相形成には数ヵ月単位の時間がかかる。線形弾性理論を採用した場合は弾性場が濃度場に比べて十分早く緩和することから濃度場の時間スケールでは平衡に達しているとし、線形な弾性場を解析的に解いて拡散現象を記述したが、今回採用した弾性理論は非線形なので解析的に解く事ができないので濃度場、弾性場双方を数値的に解く。また、金属中に点欠陥として空孔が実際の物質では普通だが、今回はスタートポイントを完全結晶に設定するため空孔の効果は採り入れない。

本来であれば方程式 (41) と (42) には弾性場による可逆な輸送項 $-\nabla \cdot (\psi \mathbf{v})$ が含まれ、それに伴ってポテンシャル条件より弾性場の方に $-\psi \nabla \delta \mathcal{F} / \delta \psi$ という項が右辺に付くはずである。しかし今回の数値計算で与える剪断変形および一軸変形は微小なので無視をする。また、自発的転位の発生では流れが微小なので無視できる。

揺動散逸定理から散逸係数 η_0 や $\lambda(\psi)$ があればそれに伴うランダム項が付随するが、熱揺らぎ $k_B T$ は弾性変形によるエネルギーに比べて十分小さいため無視することができる。

2.2.2 全エネルギーの時間発展

エネルギーが単調に減衰することだけ確認しておく。全エネルギーは以上の自由エネルギーに運動エネルギーを加えたものである。

$$\mathcal{F}_{\text{total}} = \mathcal{F} + \int d\mathbf{r} \frac{1}{2} \rho \mathbf{v}^2 \quad (44)$$

この時間微分は以下のようにして単調減少であることが示される。

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{F}_{\text{total}}}{dt} &= \int d\mathbf{r} \left[\mathbf{v} \cdot \rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \cdot \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mathbf{u}} + \frac{\partial \psi}{\partial t} \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \psi} \right] \\ &= - \int d\mathbf{r} \left[\sum_{ij} \eta_0 (\nabla_i v_j)^2 + \lambda(\psi) \left| \nabla \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \psi} \right|^2 \right] \leq 0 \end{aligned} \quad (45)$$

これよりポテンシャル条件を考慮しない範囲でも自由エネルギーは単調減少する。

2.2.3 線形弾性理論より得られる知見

線形弾性理論の適用できる範囲では上述の通り $\delta \mathcal{F} / \delta \mathbf{u} = 0$ として弾性場を解析的に消去し、 ψ で完結した理論を作る事ができる。

ドメイン境界付近で格子定数の違いから歪みが発生するが、その典型的な大きさ e_0 は線形弾性理論によれば $e_0 = \alpha \Delta \psi / 2L_0$ である。ただし L_0 は $L_0 = K + \mu_{20}$ と定義される縦波弾性係数である。また、 $\Delta \psi$ は2相の成分比の違いである。この歪みは整合な界面では力学的に安定な領域にあるはずである。つまり整合な界面ではおおよそ $1/4$ 以下の歪みに収まらなければならない。

弾性的異方性が弱く、弾性不均一性が小さい極限では一相状態が $k_B [T - T_0] / v_0 < \alpha^2 / L_0$ となると不安定になり、相分離が始まる。つまり

$$T_s = T_0 + v_0 \alpha^2 / L_0 k_B \quad (46)$$

より温度が下がると2相状態が実現される。また、ドメインサイズは $T_s - T$ が大きくなるにつれ小さくなる。

3 数値計算 (2次元)

3.1 数値計算手法

3.1.1 無次元化

適当な時間スケール、空間スケール、エネルギースケールによる規格化を行う。空間スケールは変位 $\mathbf{u} = 0$ の時の格子定数 a で、時間スケールは以下の値で規格化する。 $\tau_0 = (\rho / \mu_{20})^{1/2} a$ ここで μ_{20} は (35) で与えられている成分比に依存する一軸弾性係数 μ_2 のうち ψ に依存しない部分である。エネルギースケールはこれを用いて $\mu_{20} a^2$ で規格化する。これにより現れる定数を全て規格化すると、時間は t / τ_0 、空間ベクトルは \mathbf{r} / a などのように規格化される。この文中では諸係数を $K / \mu_{20} = 4.5$ 、 $\alpha / \mu_{20} = 0.6$ 、 $C / a^2 \mu_{20} = 0.05$ 、 $k_B T_0 / v_0 \mu_{20} = 0.05$ と設定した。このことから分かるように弾性エネルギーは熱ゆらぎに比べて十分大きいと言える。このことがランダムノイズを無視することを正当

化している。また、ここでは弾性的異方性が小さいとして $\mu_{30}/\mu_{20} = 1.1$ と設定し、弾性的不均一性は $\mu_{21}/\mu_{20} = \mu_{31}/\mu_{20} = 0.6$ と設定した。

運動係数は以下のように規格化した。 $\lambda_0^* = \lambda_0 \tau_0 \mu_{20} a^{-2}$ 、 $\eta_0^* = \eta_0 / \tau_0 \mu_{20}$ そしてこれらの値は $\lambda_0^* = 10^{-4}$ 、 $\eta_0^* = 0.1$ とした。これらの比

$$\lambda_0^* / \eta_0^* = D_0 \rho / \eta_0 \sim 10^{-3} \quad (47)$$

は拡散の特徴的タイムスケールが音波の緩和に比べて十分ゆっくりであるということを示している。

次に弾性場と濃度場の結合的数 α の値に関して考察を加える。いま、 ψ が微小量 $\delta\psi$ だけ変化したとすると、これによる微小な体積変化は $\delta e_1 = -\alpha \delta\psi / K$ 程度と見積もられる。この体積変化による格子定数の変化は以下の形で与えられる。

$$a' = \left(1 + \frac{\delta e_1}{d}\right) a = \left(1 - \frac{\alpha \delta\psi}{dK}\right) a \quad (48)$$

但し d は系の次元である。格子定数の違いを表す以下のような有名なパラメータがあるが、以上の考察より

$$\eta = \frac{1}{a} \left| \frac{\partial a}{\partial \psi} \right| = \frac{\alpha}{dK} \quad (49)$$

と与えられる。この値は合金の種類によって異なるが、最も大きい部類に属すると言われている Al-Ni 系でせいぜい 0.15 程度の値である。今回の計算では $\eta = \alpha / 2K = 0.067$ と設定した。

以上のパラメータ設定により、式 (46) の T_s はおおよそ 2.31 程度となる。

3.1.2 微分演算の詳細

数値的に式 (41) と (42) を積分するわけだが、その手順を記しておく。

数値計算をする際、空間と時間共に離散化する必要があるが、空間方向は上述の a で離散化する。時間ステップは $\Delta t = 0.01$ 程度に設定した。システムサイズはこの離散単位で 256×256 とした。

計算スキームを下手に選ぶと隣同士の影響が考慮されず、短波長で数値的に暴れてしまう。そこで次のような副格子(スタガード格子)を用いた。ベクトル u, v は格子点 (n, m) の上の関数とする。そしてそれらの一階微分である歪み成分 e_1, e_2, e_3 は格子 $(n + 1/2, m + 1/2)$ で定義する。これらから構成されるストレステンソル σ も同様の点で定義し、また ψ のようなスカラー量も同様の点で定義する。そしてベクトル場からスカラー場を計算するには図 3 のように、周囲の四点から微分等を計算してスカラー場の値を得る。一方、ベクトル場を計算するには図 4 のようにベクトル場の周囲四点のスカラー場から微分などの演算を経てベクトル場の値を得る。

3.2 欠陥の下相分離ダイナミクス (Cottrell 雰囲気)

欠陥が元々存在するとき、相分離の様子は通常と比較して大きく異なる。図 6 と図 7 はそれぞれ $T/T_0 = 2.5$ (1 相状態)、 $T/T_0 = 1.7$ (2 相状態) での欠陥周りの弾性的変形と相分離の様子である。上の図はすべりの長さを $10\sqrt{2}$ とし、下の図は 10 としている。これらの結果を得るにあたって、平均濃度を $\langle \psi \rangle = 0$ とする。そしてその上で弾性場に線形弾性理論で予言される欠陥の構造 [10] 代入し、平衡まで待った。

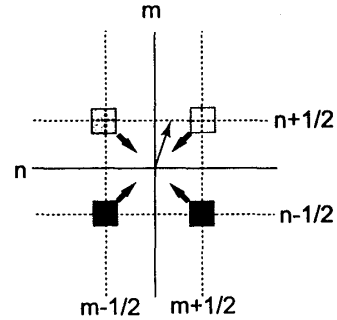
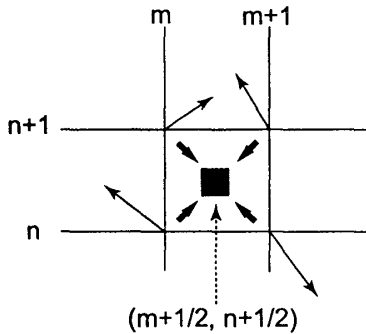


図 3: ベクトル場からスカラー場等を決定する方法。 図 4: スカラー場からベクトル場を決定する方法。

T/T_0 では大きなスケールでの相分離は観察されない (図 6)。しかし [11, 12] で数値的にも観測されたように、すべりの端点の欠陥のコア周辺に弱い相分離が観察される (Cottrell 雰囲気)。コア周辺の相分離の最大最小値はおおよそ ± 0.6 程度である。Cottrell の結果は以下の手順で得られる。温度 T は T_0 と α^2/L_0 双方より大きいとする。また、勾配項は今考えない。このとき平衡条件は $\delta F/\delta \psi = \text{const}$ なので、A 金属の濃度 c_A は

$$\frac{c_A}{1 - c_A} = \text{const.} \exp \left(-\frac{U}{k_B T} \right) \quad (50)$$

で計算される。ここで $U = v_0 \alpha e_1$ である。この引力によって金属が引き寄せられるのである。この計算では $|U|/k_B T$ はおおよそ 1 で、相分離はそれほど強くはない。

次に、この系を 2 相状態 ($T/T_0 = 1.7$) までクエンチしてみた (図 7)。そうすると、上述の Cottrell 雰囲気の部分を核としてドメインがそれに沿って成長していく様子が伺える。最終的にドメインサイズは $50a$ 程度になり、相分離の最大最小値は ± 0.9 程度となった。Léonard と Desai は以上のと似た結果を線形理論で予言される解析的な解を相分離の方程式に代入することで得た。ただし彼らの代入した解は静的なもので、当然比較的大きなスケールでの相分離と弾性場の相互作用に関しては記述することができない。実際図 6 と図 7 を見比べてみると、相分離が進行すればするほど弾性的に変形していることが伺える。

以上の考察より、結晶の上での相分離は欠陥構造の効果を無視することができないことがわかる。欠陥構造が相分離の核となり、それを中心にドメインが成長して大きくなっていく。数学的には平衡状態では $\delta F/\delta u = 0$ と $\delta F/\delta \psi = \text{const.}$ が満たされているはずである。外的な力が加わらない限り、この構造は結晶の離散性による Peiels のポテンシャルにより準安定状態にある。

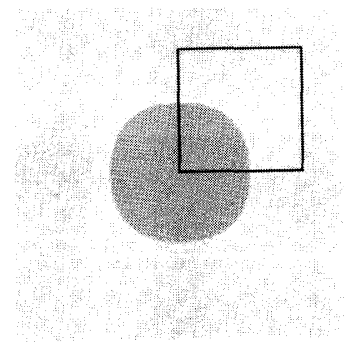


図 5: 円形のドメインを $T/T_0 = 2$ に静置しておいた図。弾性場の対称性を反映して少し四角形に変形している。四角の領域は図 9 で表示されているベクトル場の領域。

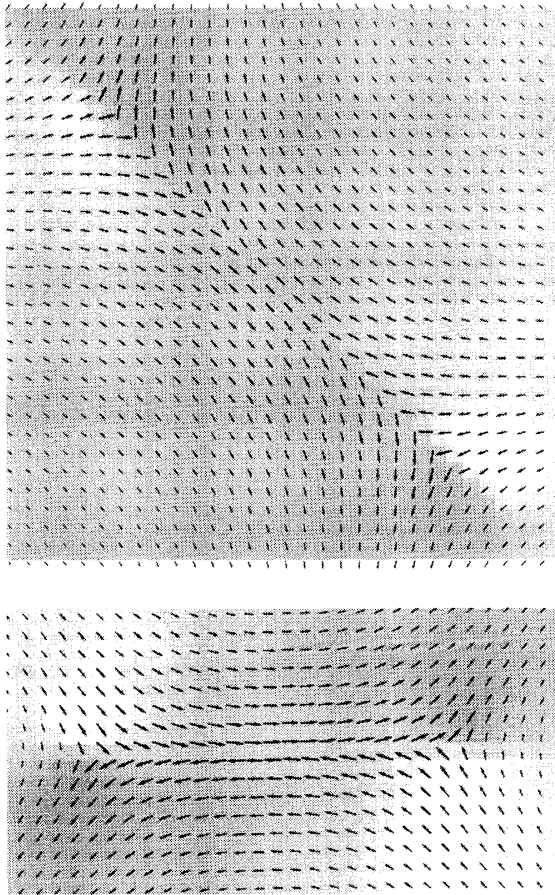


図 6: 1 相状態 ($T/T_0 = 2.5$) にすべりを配置し、そのコア周辺で弱い相分離が進んでいる様子。上は斜め 45 度のすべり、下は x 軸方向のすべり。

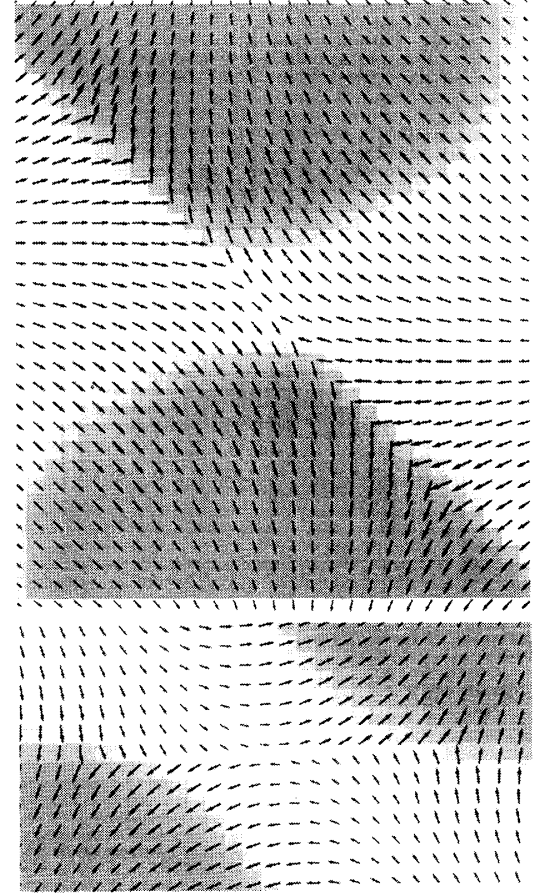


図 7: 2 相状態 ($T/T_0 = 1.7$) までクエンチし、コアを中心に強い相分離が進んでいる様子。上は斜め 45 度のすべり、下は x 軸方向のすべり。

3.3 硬いドメイン周りの欠陥生成

図 5 は最初に大きな円形のドメインを作成し、真中に $T/T_0 = 2$ の軽くクエンチされた環境の元で暫く静置しておいた後の結果である。ここで ψ の最大最小値はおおよそ ± 0.7 程度で、ドメイン内部で正の値、外部で負の値を取る。当初円形のドメインを静置していたが、結晶の対称性を反映して若干四角形に変形している。

この系を $T/T_0 = 1$ さらにクエンチする。金属成分の拡散は非常にゆっくり起きるので完全に平衡に達するまでかなりの時間がかかるが、相分離は界面から進行して行くため、成分比の違い $\Delta\psi$ は表面付近ですぐに 1.8 程度になる。その結果、おおよそ二回目のクエンチから $t = 1000$ 程度経ったところで $|e_2|$ の最大値が $1/4$ を越え、図 2 で説明した力学的不安定性が界面付近で現れ、転位が界面付近から発生し、同時に転位を中心に音波が発生して周囲に伝播していく。図 9 の左は整合な場合の界面付近の弾性変形を示している。右図は転位が発生して 1000 程の時間の後の変位から前述の整合な場合の変形を引いたもの、つまり $\delta u = u - u_{\text{coh}}$ を表示している。右の状態のエネルギーは左の状態のものに比べて 152.9 程小さい。欠陥発生のプロセスの詳細は以下の通りである。

1. 二つのペアのすべり (つまり四つの欠陥) が同時に発生した²。
2. これらはどちらとも軟らかい成分の領域に優先的に走っていく。
3. 欠陥同士が時々衝突し、停止する。その結果ほぼ定常な弾性変形が現れる。そしてそのもう一方の欠陥は界面付近に留まっている。

以上の三つのプロセスは殆ど時間にして 100 程度の間に起きる。上記の欠陥発生の後、成分比は界面付近と合わせて欠陥周辺で Cottrell 雰囲気により徐々に変化していく。 $t = 23000$ 付近での結果を幾つか紹介する。図 8 は以下のものの濃淡プロットである。

$$e = \sqrt{e_2^2 + e_3^2} \quad (51)$$

これは式 (20) にから分かる通り、回転変換に対して不変な変形を表す。この黒い部分がおおよすべり面を表すと考えて差し支えない。 $|e_2|$ の大きな領域では x 軸に対して $\pm\pi/4$ の角度を持ったすべりが発生している。それに対し、 $|e_3|$ の大きな領域では x 軸と平行かもしくは垂直なすべりとなって現れる。図 10 は $t = 23000$ での自由エネルギー密度を表す。ドメインの外のピークは欠陥のコアを表す。表面では界面エネルギーのために崖のような構造が観察される。図 11 は秩序パラメータ ψ を表している。欠陥周辺では Cottrell 雰囲気のために金属成分がそれを核として成長しようとしている様子が伺える。この系はまだ過渡期で界面付近での拡散はまだ活発に起きている。

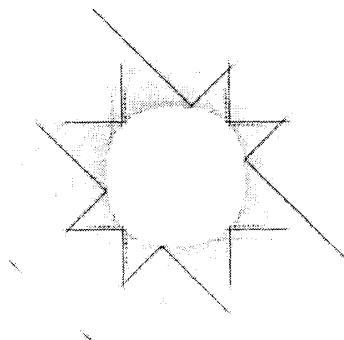


図 8: $e = \sqrt{e_2^2 + e_3^2}$ の欠陥発生後のプロット。すべりが界面付近から発生し、適当なところでストップしている。

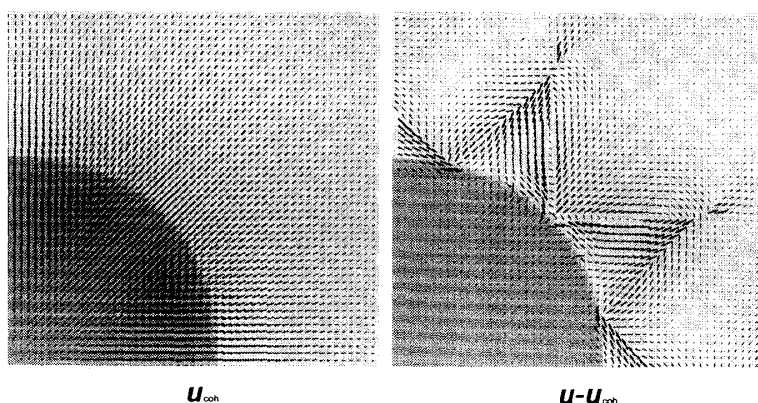


図 9: 左図:整合な界面の場合のその周辺の変形。転位が発生する直前の図。右図:不整合な界面の場合の変形。大きく変形しているので直前の整合なベクトル場の分を引き算している。

²これは計算の初期条件で与えた値の対称性が良すぎるためではないかと考えている。

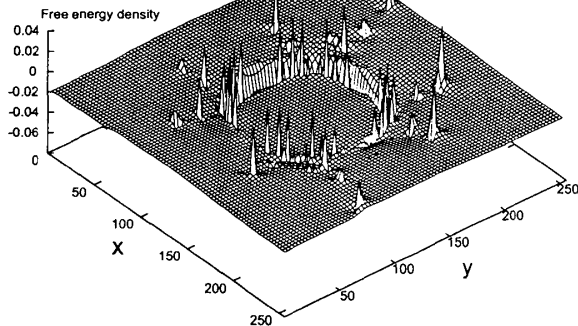


図 10: 自由エネルギー密度のスナップショット。ピークは転位のコアを表しており、崖のような部分は界面エネルギーを表している。

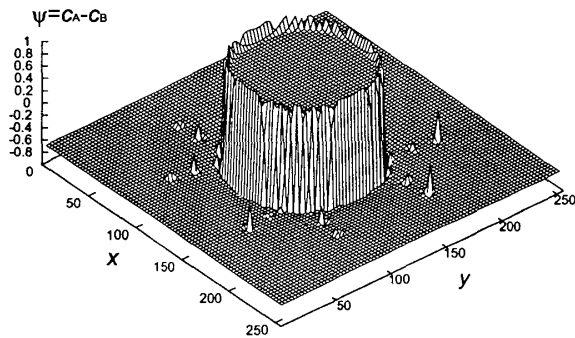


図 11: 硬いドメイン周りの秩序パラメータ ψ の様子。スナップショット。界面付近のピークのようなものは、系がまだ界面から始まった相分離が進行している最中であるためである。ドメインの外でのピークは欠陥周囲に集まった Cottrell 雰囲気のためである。表示の関係で最小のピークは見えないが、逆向きのピークも存在する。

3.4 ネットワーク構造における欠陥生成

導入部分で述べた通り、スピノダル分解をする合金はその後期課程で硬い成分が塊となり、軟らかい成分がネットワーク構造を取る Modulated Pattern と呼ばれるドメイン構造を形成する (図 12)。最初に図 12 のようなドメイン構造を $T/T_0 = 2$ の状態で準備しておき、先程の計算と同様にそこから更にクエンチをすることで欠陥が発生することを確認する。硬いドメイン (灰色の部分) は弾性的に均一 (つまり剪断変形や一軸変形をしていない) で、ネットワーク上の領域は主に一軸的に変形している。これは弾性不均一性と呼ばれるもので、メゾスコピックな構造形成に大きな役割を担う。隣接している硬いドメインの間の変形で、水平なストライプでは $e_2 \sim 0.2$ 程度の一軸変形をしており、一方垂直なストライプでは $e_2 \sim -0.2$ 程度の変形をしている。

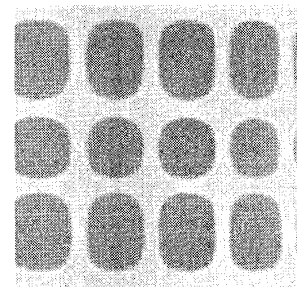


図 12: $T/T_0 = 2$ の元に静置した整合なドメイン構造。

以上の状態を準備した後 $T/T_0 = 1$ までクエンチし、金属成分の相分離を更に促進する。図 13 は全自由エネルギーと式 (51) の e を時系列で表示したものである。この図では \mathcal{F} は殆どクエンチによって金属成分が拡散することによって減少するのだが、時々欠陥発生によってエネルギーが減少する。この様子は小さい方のグラフに描かれている。欠陥が発生すると前回の計算と同様に軟らかい所に優先的にすべりが発生し、それがもう一方の界面にぶつかって静止する。金属成分の拡散はおおよそ $R^2/D_0 \sim 10^5 - 10^6$ 程度の時間 (R はドメインの半径) で完了するので、図 13 はまだ完全に平衡に達したわけではない。図 14 は図 13 の B、C、D の左上に見られる四角の領域の弾性場 u を表示したものである。一方 15 は同様の四角の領域の自由エネルギー密度を鳥瞰したもので、左図は初期条件として準備した時の様子で主に界面エネルギーのみが観察されるのに対して、右図は欠陥の発生に伴うエネルギーのピークが複数観察される。

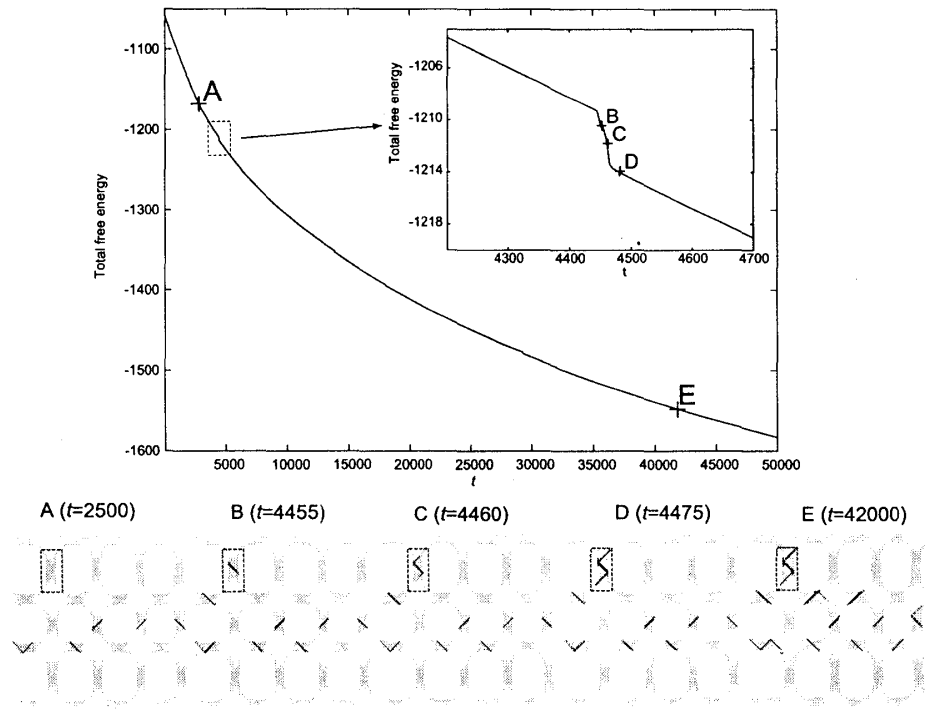


図 13: $T/T_0 = 1$ にクエンチしたときの自由エネルギー \mathcal{F} の緩和過程をプロットした図。下の図はすべり面 e の様子を A から E の各点に関して表示したものである。

3.5 2 相状態での変形

2 次元計算の最後に 2 相状態での塑性変形について触れておく。初期条件で $\langle \psi \rangle = 0$ としたドメイン構造 (図 12) に塑性変形を加える。底の部分 ($y = 0$) では弾性場を固定 ($u_x = u_y = 0$) として、上部 $y = L_0$ で $u_x = -u_y = \epsilon L_0/2$ の境界条件を与える。単位時間当たりの変形率は $\dot{\epsilon} = 10^{-4}$ にセットし、時間が経つにつれて $\epsilon = \dot{\epsilon}t$ という変形をしていく。図 16 は全系でのストレスの平均を縦軸に、横軸に歪み ϵ をプロットしたものである。ここでストレスの平均 N_1 は以下のように定義した。

$$N_1 = \langle \sigma_{xx} - \sigma_{yy} \rangle = \frac{1}{\pi} \langle \mu_2 \sin(2\pi e_2) \rangle \quad (52)$$

この図では三種類の歪み-応答曲線が描かれているが、これらはそれぞれ 1 相状態 ($T/T_0 = 3$)、弱い 2 相状態 ($T/T_0 = 2.4$)、2 相状態 ($T/T_0 = 2$) での歪み-応答曲線である。 $T/T_0 = 3$ では殆ど 1 相状態で、 ψ の最大最小値はせいぜい ± 0.01 程度である。 $T/T_0 = 2.4$ では ψ の最大最小値は ± 0.32 で、 e_2 は ± 0.05 程度である。 $T/T_0 = 2$ ではこれらはそれぞれ ± 0.75 、 ± 0.20 程度で、より強く相分離している。初期状態として与えたものは全て整合な界面を持っていて欠陥を有さない。 $T/T_0 = 3$ では力学的な不安定性は

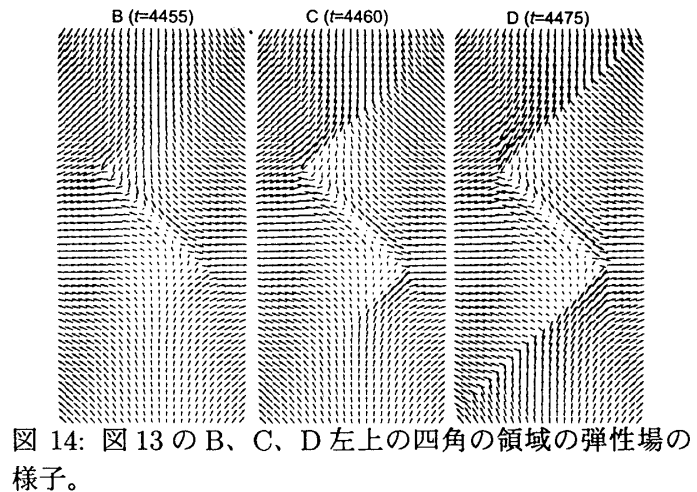


図 14: 図 13 の B、C、D 左上の四角の領域の弾性場の様子。

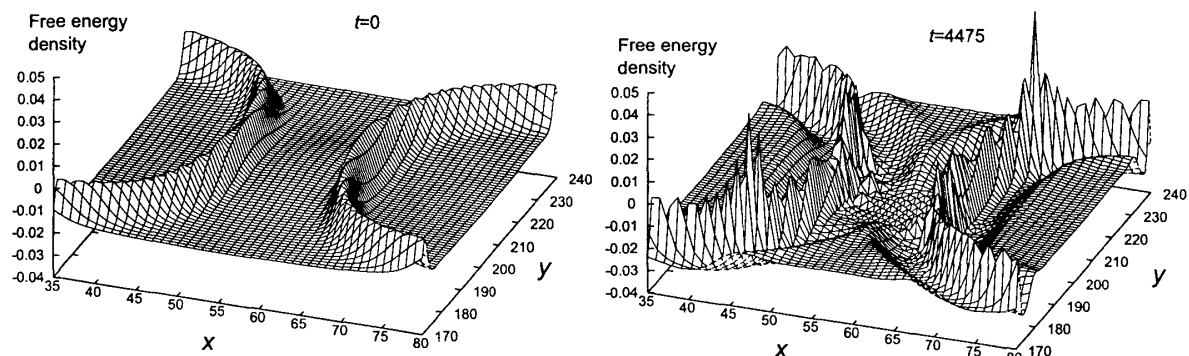


図 15: 左図:初期条件として準備したドメイン周りの自由エネルギー密度。右図:欠陥発生後の自由エネルギー密度。界面付近で鋭いピークが見られる。

$\epsilon = 1/4$ あたりから発生し始め、右下の図にあるように、系全体にほぼ一様なメッシュ様のすべりが発生する。 $T/T_0 = 2.4$ ではおおよそ $\epsilon = 0.17$ 程度から力学的に不安定になり、すべりが発生する。 T/T_0 では塑性変形が始まるのは随分早く、 $\epsilon = 0.015$ 程度で発生する。歪み-応答曲線もすべりの発生以降はジグザグな振舞いを見せ、ストレスは欠陥発生後も全体として上昇傾向にある。図 17 は e と式 (34) を表示したものである。ドメインの真中付近の一軸的に伸びている領域から X 字のようにすべりが発生し ($\epsilon = 0.05$)、表面で止められ ($\epsilon = 0.1$)、そのすべりが成長して **Shear Band** と呼ばれる剪断領域が太っていく現象が見られる ($\epsilon = 0.2$)。この計算ではドメイン間隔が若干狭かったためネットワーク構造の真中から欠陥が発生したが、広い場合は界面付近から発生すると予測される。

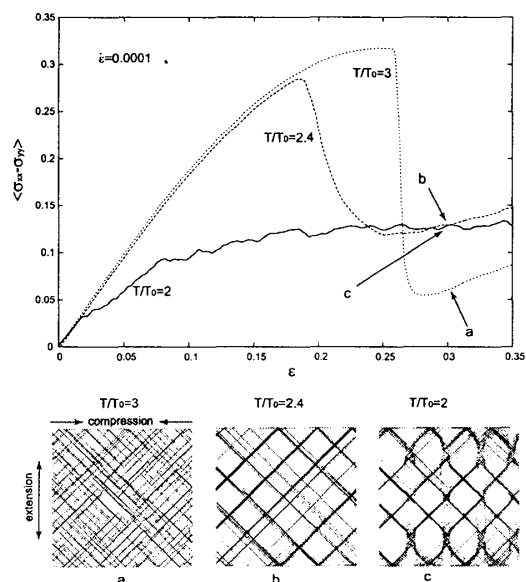


図 16: 1 相状態 ($T/T_0 = 3$)、弱い 2 相状態 ($T/T_0 = 2.4$)、2 相状態 ($T/T_0 = 2$) での歪み-応答曲線。下図は $\epsilon = 0.3$ での各点 a、b、c での $e = \sqrt{e_2^2 + e_3^2}$ の様子。

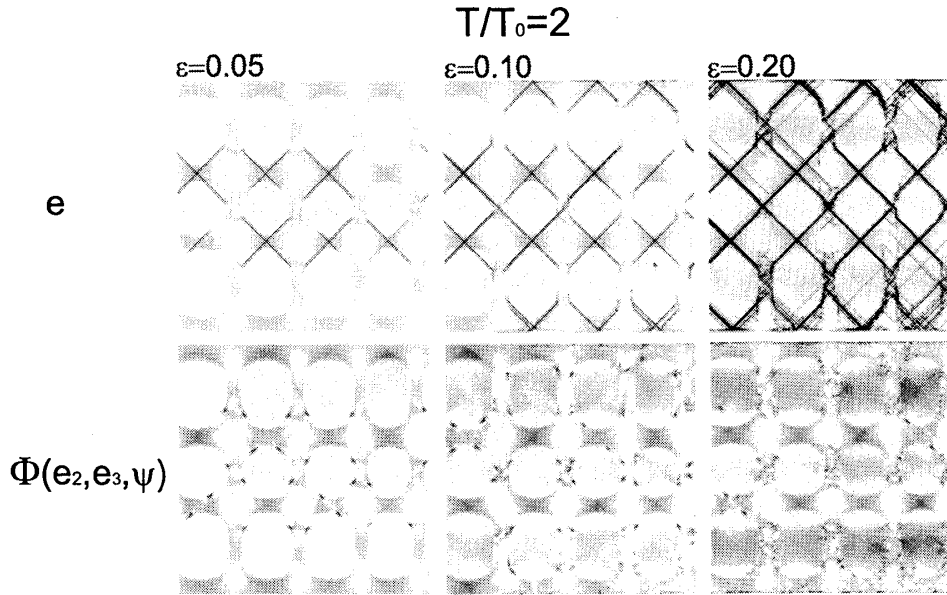


図 17: $T/T_0 = 2$ での e と式 (34) の $\Phi(e_2, e_3, \psi)$ の様子。下図の黒い点が欠陥のコアを表す。

4 モデル(3次元)

3次元の結晶における欠陥構造は2次元の場合と幾つかの点で異なる様子を見せる。まず第一にすべりはエネルギー的な要請から2次元では線であったところが、3次元では面状のすべりを持つようになる。また欠陥構造は点状であったが、3次元では線状である。転位線は通常エネルギーを小さくするために環状を取るか、境界面まで伸びる。このように複雑な系に対するアプローチは古くは Nabarro の本 [13] など、最近の物では Wang らによるアプローチ [14] が知られている。ここでは対称性と周期性に注目した本論文の手法で3次元の弾性論を展開する。

4.1 非線形弾性エネルギー

4.1.1 歪み成分

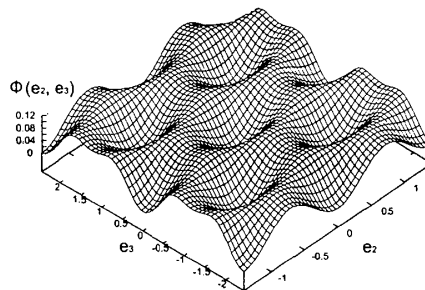


図 18: $\Phi(e_2, e_3)$ の鳥瞰図。中央の原点はすべりや変形がないことを表す点で、原点周辺に結晶格子一つ分すべった事に対応する六つのポテンシャルの谷底がある。

3次元における歪み成分は全部で六つある。

$$e_1 = \nabla \cdot \mathbf{u} \quad (53a)$$

$$e_2 = \nabla_x u_x - \nabla_y u_y \quad (53b)$$

$$e_3 = \frac{1}{\sqrt{3}} (2\nabla_z u_z - \nabla_x u_x - \nabla_y u_y) \quad (53c)$$

$$e_4 = \nabla_x u_y + \nabla_y u_x \quad (53d)$$

$$e_5 = \nabla_y u_z + \nabla_z u_y \quad (53e)$$

$$e_6 = \nabla_z u_x + \nabla_x u_z \quad (53f)$$

(53b)、(53c) 一軸変形を表し、(53d)、(53e)、(53f) は剪断変形を表す。また、(53a) は体積変形を表す項である。今回の議論では系は立方格子の対称性を持っているとし、 $x \cdot y \cdot z$ 軸それぞれの $\pi/2$ 回転に対する変換を調べることで立方格子の対称性を保有した弾性エネルギーを書き下すことにする。

z 軸周りの $\pi/2$ 回転では歪み成分は以下のように変換される。

$$\begin{aligned} e'_1 &= e_1, & e'_2 &= -e_2, & e'_3 &= e_3 \\ e'_4 &= -e_4, & e'_5 &= -e_5, & e'_6 &= e_5 \end{aligned} \quad (54)$$

一方、 x 軸周りの $\pi/2$ 回転では歪み成分は以下のように変換される。

$$\begin{aligned} e'_1 &= e_1, & e'_2 &= e_2/2 - \sqrt{3}e_3/2, & e'_3 &= -\sqrt{3}e_2/2 - e_3/2 \\ e'_4 &= e_6, & e'_5 &= -e_5, & e'_6 &= -e_4 \end{aligned} \quad (55)$$

最後に y 軸周りの $\pi/2$ 回転では歪み成分は以下のように変換される。

$$\begin{aligned} e'_1 &= e_1, & e'_2 &= e_2/2 + \sqrt{3}e_3/2, & e'_3 &= \sqrt{3}e_2/2 - e_3/2 \\ e'_4 &= -e_5, & e'_5 &= e_4, & e'_6 &= -e_6 \end{aligned} \quad (56)$$

以上の三つの回転変換から分かる通り、回転変換に対して e_1 は不変である。それに対して e_2 と e_3 は回転に対して不変ではないが、これらだけで閉じた変換をする。同様に $e_4 \cdot e_5 \cdot e_6$ も不変ではないがこれら三つで閉じている。弾性エネルギーを書き下す際には e_2 と e_3 (一軸的伸張) に関する自由エネルギーと $e_4 \cdot e_5 \cdot e_6$ (剪断変形) に関する自由エネルギーを独立に考えることにする。

4.1.2 弾性エネルギー

e_2 は斜め $\pi/4$ 方向のすべりに対して周期的でなければならないので、 e_2 の関与する自由エネルギーは $\sqrt{2}$ の周期を持たねばならない。また、実空間での $\pi/2$ 回転は e_2 - e_3 平面での $\pi/3$ 回転に似ているので、立方対称性を持った自由エネルギーの形式は三角格子の弾性エネルギーを参考として以下のように書き下せる。

$$\mathcal{F}_{el} = \int d\mathbf{r} \left[\frac{K}{2} e_1^2 + \Phi(e_2, e_3) + \Psi(e_4, e_5, e_6) \right] \quad (57a)$$

$$\Phi(e_2, e_3) = \frac{\mu_2}{4\pi^2} \left[3 - \cos 2\pi \left(\frac{e_2}{\sqrt{2}} - \frac{e_3}{\sqrt{6}} \right) - \cos 2\pi \left(\frac{e_2}{\sqrt{2}} + \frac{e_3}{\sqrt{6}} \right) - \cos \left(4\pi \frac{e_3}{\sqrt{6}} \right) \right] \quad (57b)$$

$$\Psi(e_4, e_5, e_6) = \frac{\mu_3}{4\pi^2} [3 - \cos(2\pi e_4) - \cos(2\pi e_5) - \cos(2\pi e_6)] \quad (57c)$$

もちろん回転不変な形式はこの他にも幾つかある。しかし各ポテンシャルの極小点に物理的意味付けができない形式は除外せねばならない。その点、この形式では以下に述べる通り物理的意味付けが可能である。 $\Phi(e_2, e_3)$ を e_2 - e_3 平面上でプロットしたものが図 18 である。中央の原点はすべりや変形がないことを表す点で、原点周辺に結晶格子一つ分すべった事に対応する六つのポテンシャルの谷底がある。これらはそれぞれ三つの結晶軸 (ここでは xyz 軸と一致) に対して $\pi/4$ の角度方向に $\sqrt{2}$ の大きさを持つすべりに対応する極小点である。このことは図 19 に詳しく記されている。 $(\pm\sqrt{2}, 0)$ の点は x 軸または y 軸に $\pi/4$ の角度を為すすべりである。一方、式 (55) と式 (56) により $(\pm\sqrt{2}, 0)$ はそれぞれ x 軸回りの変換に対して

$$e'_2 = \pm \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad e'_3 = \mp \frac{\sqrt{6}}{2} \quad (58)$$

と変換し、 y 軸回りの変換に対して

$$e'_2 = \pm \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad e'_3 = \pm \frac{\sqrt{6}}{2} \quad (59)$$

と変換する。図 19 に描かれている通り、原点周辺の六つの極小点は x 軸または y 軸と $\pi/4$ をなすすべりを回転させたもの、つまり xy 軸・ yz 軸・ zx 軸に対して角度 $\pi/4$ を為す大きさ $\sqrt{2}$ のすべりを表す。これら六つの点より更に離れた極小点はこれらの六点よりもう一段階すべったことに相当する極小点である。

系が 2 相状態であることで歪んでいたり、予めすべりが発生していてその周辺で歪んでいるような初期歪み (eigen deformation) 近傍での擾乱に関して、式 (57b) のポテンシャル $\Phi(e_2, e_3)$ の力学的安定性を議論することができる。ある歪み e_2 と e_3 に対して微小歪み δe_2 と δe_3 を加え、それに対する安定性を調べる為に $\Phi(e_2 + \delta e_2, e_3 + \delta e_3)$ を 2 次まで展開して以下のような式を得る。

$$\delta^{(2)}\Phi = \frac{\Phi_{22}}{2}(\delta e_2)^2 + \frac{\Phi_{23}}{2}\delta e_2\delta e_3 + \frac{\Phi_{33}}{2}(\delta e_3)^2 \quad (60)$$

力学的擾乱 δe_2 と δe_3 に対して安定であるためには 2×2 行列 $\{\Phi_{\alpha\beta}\}$ ($\alpha, \beta = 2, 3$) の固有値が正でなければならない。このことに基づいて安定領域を白で、不安定領域を黒で表したのが図 20 である。図中で安定領域内の変形に留まっている時は力学的なゆらぎに対して安定だが、不安定領域に居る場合は力学的ゆらぎに対して不安定で、結晶軸に対して $\pi/4$ の角度を為すすべりが発生する。この安定領域は安

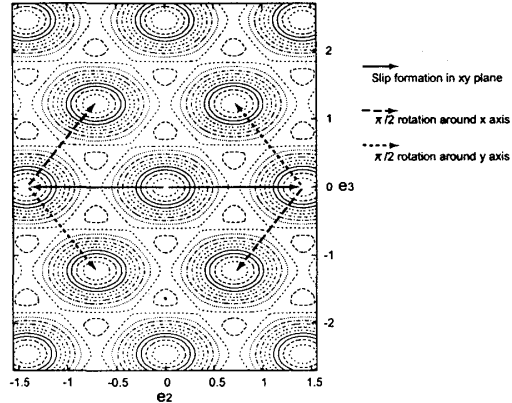


図 19: 原点周辺のポテンシャル極小点と、その物理的な意味。 $(\pm\sqrt{2}, 0)$ の点は x 軸または y 軸に $\pi/4$ の角度を為すすべりである。そしてその周辺の点は式 (55) と式 (56) により x 軸または y 軸回りの $\pi/2$ 回転により得られる。

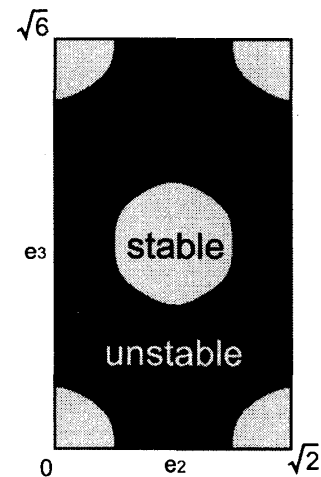


図 20: 式 (57b) において力学的に安定な領域が白、不安定な領域が黒としたプロット。

定中心に対してほぼ等方的で、おおよそ以下の領域にある場合は力学的に安定であると言える。

$$|e - m| < \frac{1}{4} \quad (61)$$

ここで $e = \sqrt{e_2^2 + e_3^2}$ と定義した。同様の手続きで剪断変形についてのポテンシャルである式 (57c) の安定性も微小変形に対して2次まで取ることで以下のように展開される。

$$\delta^{(2)}\Psi(e_4, e_5, e_6) = \frac{\Phi_{44}}{2} (\delta e_4)^2 + \frac{\Phi_{55}}{2} (\delta e_5)^2 + \frac{\Phi_{66}}{2} (\delta e_6)^2 \quad (62)$$

これは予め対角化されている形式なので固有値を計算するまでもなく安定条件は

$$\Psi_{\alpha\alpha} > 0 \quad (\alpha = 4, 5, 6) \quad (63)$$

と与えられる。これは簡単に解くことができ、安定領域は以下のように与えられる。

$$|e_\alpha - m| < \frac{1}{4} \quad (\alpha = 4, 5, 6) \quad (64)$$

ここでは m は整数である。この領域より外に出た時、力学的不安定性が発生して結晶軸に水平もしくは垂直方向にすべる。

4.2 2相合金におけるダイナミクス

自由エネルギーの定義は式 (38) と同様で、弾性エネルギーの部分だけが式 (57a) に変わったものを用いる。

応力テンソルの定義

$$\nabla \cdot \vec{\sigma} = -\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mathbf{u}} \quad (65)$$

を用いれば、応力テンソルを以下のように書き下すことができる。

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} = & K e_1 + \alpha \psi \\ & + \frac{\mu_2}{3\sqrt{2}\pi} \left[2 \sin 2\pi \left(\frac{e_2}{\sqrt{2}} - \frac{e_3}{\sqrt{6}} \right) + \sin 2\pi \left(\frac{e_2}{\sqrt{2}} + \frac{e_3}{\sqrt{6}} \right) - \sin \left(4\pi \frac{e_3}{\sqrt{6}} \right) \right] \end{aligned} \quad (66a)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{yy} = & K e_1 + \alpha \psi \\ & - \frac{\mu_2}{3\sqrt{2}\pi} \left[2 \sin 2\pi \left(\frac{e_2}{\sqrt{2}} + \frac{e_3}{\sqrt{6}} \right) + \sin 2\pi \left(\frac{e_2}{\sqrt{2}} - \frac{e_3}{\sqrt{6}} \right) + \sin \left(4\pi \frac{e_3}{\sqrt{6}} \right) \right] \end{aligned} \quad (66b)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{zz} = & K e_1 + \alpha \psi \\ & + \frac{\mu_2}{3\sqrt{2}\pi} \left[2 \sin \left(4\pi \frac{e_3}{\sqrt{6}} \right) - \sin 2\pi \left(\frac{e_2}{\sqrt{2}} - \frac{e_3}{\sqrt{6}} \right) + \sin 2\pi \left(\frac{e_2}{\sqrt{2}} + \frac{e_3}{\sqrt{6}} \right) \right] \end{aligned} \quad (66c)$$

$$\sigma_{xy} = \sigma_{yx} = \frac{\mu_3}{2\pi} \sin(2\pi e_4) \quad (66d)$$

$$\sigma_{yz} = \sigma_{zy} = \frac{\mu_3}{2\pi} \sin(2\pi e_5) \quad (66e)$$

$$\sigma_{zx} = \sigma_{xz} = \frac{\mu_3}{2\pi} \sin(2\pi e_6) \quad (66f)$$

運動方程式は以下の物を採用した。

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \nabla \cdot \lambda(\psi) \nabla \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \psi} \quad (67a)$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \nabla \cdot \vec{\sigma} + \eta \nabla^2 \mathbf{v} \quad (67b)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \mathbf{u} \quad (67c)$$

一様な変形をかける場合は一様な変形 \mathbf{u}_0 とそれに伴う変形速度 \mathbf{v}_0 からのずれを計算することで周期境界条件を課することができる。つまり、弾性場と速度場をそれぞれ

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_0 + \delta \mathbf{u} \quad (68a)$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_0 + \delta \mathbf{v} \quad (68b)$$

として $\delta \mathbf{u}$ と $\delta \mathbf{v}$ についての方程式を解く。一様変形は時間に比例する形で与えるとすれば、その変形速度 \mathbf{v}_0 は時間に依存しない。これを踏まえて式 (68) を式 (67) に代入すれば以下の方程式が得られる。

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta \mathbf{u} = \delta \mathbf{v} \quad (69a)$$

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} \delta \mathbf{v} = \nabla \cdot \vec{\sigma} + \eta \nabla^2 \delta \mathbf{v} \quad (69b)$$

一様変形を加える際はこの式を解くことにする。

5 数値計算 (3次元)

この章では3次元における数値計算の結果を紹介するが、無次元化の手法や定数の選び方及び微分演算の定義の方法は2次元の場合と殆んど同じであるため、異なっている部分に関してのみ言及する。

空間スケールは2次元の場合と同様に変位 $\mathbf{u} = 0$ の際の格子定数 a とし、時間スケールを以下の値で規格化する。 $\tau_0 = (\rho/\mu_{20})^{1/2} a$ ここまでは2次元と同様である。異なるのはエネルギースケールの規格化で、以下の値で規格化する。 $\mu_{20} a^3$ これらで規格化した定数は α を除いて全て同じ値を採用した。今回の計算では $\alpha = 1.5$ とした。式 (49) によれば、格子定数の違いを表すパラメータ $\eta = 0.11$ 程度で、最大の格子定数の違いを持つと言われる Al-Ni 合金の値 0.15 より小さいため、現実的なパラメータ選びであると言えることができる。また、温度は $T = 0.42$ と設定した。

微分演算の定義の方法は3.1.2節で説明した通り、ベクトル場からスカラー場を計算する場合は前進差分を用い、スカラー場からベクトル場を計算する場合は後退差分を用いる。また、陰的に数値計算できる箇所はCrank-Nicolson法を用いた。3次元計算ではメモリの容量の問題と数値計算にかかる時間の問題から2次元の場合よりシステムサイズを小さくし、 $64 \times 64 \times 64$ の格子上で離散化して計算した。

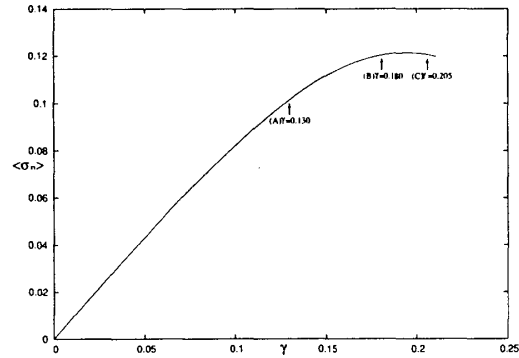


図 21: 剪断変形の Stress-Strain Curve。各点 (A)(B)(C) はそれぞれ $\gamma = 0.130, 0.180, 0.205$ を指し、各点での系の詳細は図 25 に描かれている。

5.1 硬いドメイン周りの欠陥生成

まず初めに系の中心に半径 15 の球形のドメインを設置し、十分時間をおいて平衡に達するまでそれを静置した。図 24 にその様子を 3 次元等値面表示でプロットしている。赤い領域より内側は ψ が正の領域で、硬い成分の金属が多く占める領域である。

この図からは分かりにくいですが、 ψ の球形ドメインは結晶の対称性を反映して若干四角い形状を取るようになる。十分時間を置いた結果、 ψ の最大値と最小値はそれぞれ 0.36、 -0.58 となっている。 e_2 は xy 面内の一軸変形を表すため、 x 軸方向に面する境界では x 方向に一軸伸長し (赤い領域)、 y 軸方向に面する境界では y 軸方向に一軸伸長する (青い領域)。これの最大値と最小値は ± 0.144 程度であった。一方、 e_4 は剪断変形を表す変数であるが、ドメインの角付近で大きく剪断変形する。最大値と最小値は ± 0.122 程度であった。以上の結果は全て xy 面内での変形を扱ったものであるが、 yz 面と zx 面内でも同様の事が言える。そしてこの系ではドメインの存在によって初期的に界面付近で歪みが生じ、弾性的に弱っているため、初期歪みの大きい領域では欠陥が発生しやすい。以下ではこの系に一樣な剪断変形と一軸変形を加えることで 2 次元の場合と異なる欠陥の生成を確認することにする。

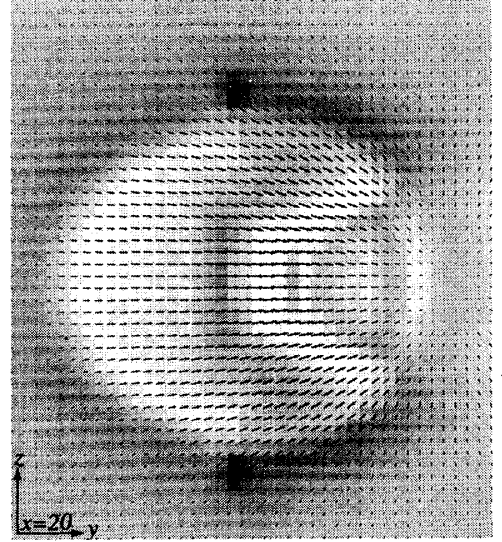


図 22: $\gamma = 0.180$, $x = 20$ での断面における剪断弾性エネルギーの濃淡プロットと、その面への変位の一樣変形からのずれ $\delta \mathbf{u} = \mathbf{u} - \mathbf{u}_0$ を断面に射影したもの。黒っぽい領域が剪断弾性エネルギーの高い領域。この右側あたりに球形のドメインがある。

5.1.1 一樣剪断変形に伴う欠陥発生

以上の系に対して z 軸に垂直な方向に一樣な剪断変形を加える。式 (68) にある一樣変形 \mathbf{u}_0 及び \mathbf{v}_0 は $u_{0x} = \gamma y$, $v_{0x} = \gamma y$ とした。但し、 $\gamma = \dot{\gamma} t$ としている。これは予め界面付近で歪んでいる系に対してさらに xy 面内の剪断変形 $e_4^0 \equiv \nabla_x u_{0y} + \nabla_y u_{0x} = \gamma$ の変形を加えることになり、初期歪みと外部変形合わせた分が前述の不安定領域に達したときにすべりが発生する。式 (64) によれば変形が 0.25 を越えたあたりから不安定化するため、 $\gamma \approx 0.13$ あたりで不安定化による欠陥発生が起きると予測される。今回の数値計算では剪断変形率を $\dot{\gamma} = 0.001$ に設定した。図 21 では横軸に剪断変形率 γ を、縦軸に系全体の平均の応答

$$\langle \sigma_{xy} \rangle = \frac{1}{V} \int d\mathbf{r} \sigma_{xy} \quad (70)$$

をプロットしている。変形の序盤では応答は線形だが、先程予想した $\gamma = 0.13$ あたりから徐々に線形性を失い、塑性領域に入る。図 25 では各 γ の値における e_4 と $\mu_3 \Psi(e_4, e_5, e_6)$ の等値面表示を表している。最初設置したドメインは中心付近にあるため、中心からおおよそ 15 程離れた界面の特定の箇所からすべりが発生する (図 21 と図 25 の (A) 点)。このときの剪断変形率は $\gamma = 0.130$ で、上述の安定性解析から得られた予測とほぼ完全に一致する。これに対して更にずりをかけたのが図 21 と図 25 の (B) 点である。このとき剪断変形率は $\gamma = 0.180$ である。2 次元の場合と同様に界面付近から軟

らかい金属成分の方に優先的にすべりが発生し、それが軟らかい方に進行している様子が観察される。すべりは2次元では線であったが、3次元では面で発生した方がエネルギー的に低いため、図25の e_4 のような結果となる。転位周辺では弾性的なエネルギーが大きくなっている。ここでは特に剪断に関わる部分だけを取り出してプロットしたのが図25の $\mu_3\Psi(e_4, e_5, e_6)$ である。2次元では欠陥構造が点として現れたが、3次元ではエネルギー的な要請から線として現れる。それが系全体に進行していく様子が(C)点である。図21から分かる通り、この点に達した段階では変形に対して既に弾性的ではなく、塑性領域に移ろうとしている。実際、図25に見られる通り、すべり面と欠陥ループが系全体に広がり増え続けている。

図22では $x = 20$ での断面における剪断弾性エネルギー $\mu_3\Psi(e_4, e_5, e_6)$ の大きさを黒が高エネルギーで白が低エネルギーの濃淡で表したものと、弾性場の一様変形からのずれ $\delta\mathbf{u} = \mathbf{u} - \mathbf{u}_0$ を同時に表示している。ずれ $\delta\mathbf{u}$ の大きい領域は既にすべりが発生した領域であるため、エネルギー的には解放され、低いエネルギーになっている。それに対してすべっていない領域(外側)では一様変形のためにすべった領域に比べてエネルギーが若干高くなっている。また、すべりの発生している部分とすべっていない部分の境界付近は欠陥があるためにエネルギーが高くなっている。

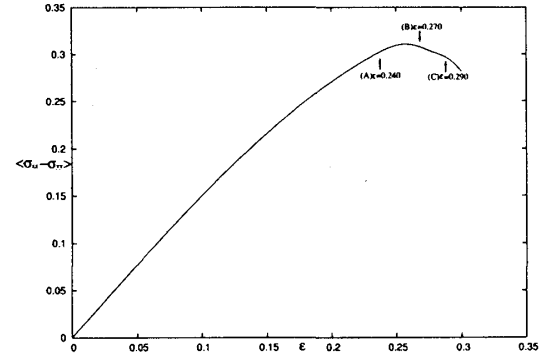


図23: 伸長変形の Stress-Strain Curve。各点(A)(B)(C)はそれぞれ $\epsilon = 0.240, 0.270, 0.290$ を指し、各点での系の詳細は図26に描かれている。

5.1.2 一様伸長に伴う欠陥発生

一様剪断変形と同様にして x 方向への一様伸長変形を加える。 \mathbf{u}_0 と \mathbf{v}_0 はそれぞれ $u_{0x} = \epsilon x$ 、 $v_{0x} = \dot{\epsilon} x$ と設定し、このときの一様伸長に関する歪み成分は $e_2^0 \equiv \nabla_x u_{0x} - \nabla_y u_{0y} = \epsilon$ となる。剪断変形の場合と同様に、力学的不安定領域に変形が達したときにすべりが発生する。式(61)によれば、外的な変形と初期歪みを合わせた分が0.354程度になると力学的に不安定化するため、 $\epsilon \approx 0.21$ あたりで不安定化による欠陥発生があると予測される。今回の数値計算では $\dot{\epsilon} = 0.001$ に設定した。

図23では伸長変形に伴う Stress-Strain Curve を横軸に ϵ 、縦軸に応答

$$\langle \sigma_{xx} - \sigma_{yy} \rangle = \frac{1}{V} \int d\mathbf{r} [\sigma_{xx} - \sigma_{yy}] \quad (71)$$

をプロットしたものである。剪断変形と同様に序盤は線形に応答するが、先程の予測通り $\epsilon = 0.210$ あたりから線形則から外れ始める。図26では図23の各(A)(B)(C)における一軸変形 e_2 の様子と一軸弾性エネルギー $\mu_2\Phi(e_2, e_3)$ をプロットしている。すべりが面状、欠陥が環状に発生する点は剪断変形と何ら異なることはないが、一軸的な伸びに対してはすべりは伸長方向に対して $\pi/4$ の角度を為す。図27はその $z = 25$ での断面の $x = 40$ 付近の伸長弾性エネルギーと変形を示したものである。すべりに伴ってその周囲で大きな変形が起きていることがわかる。

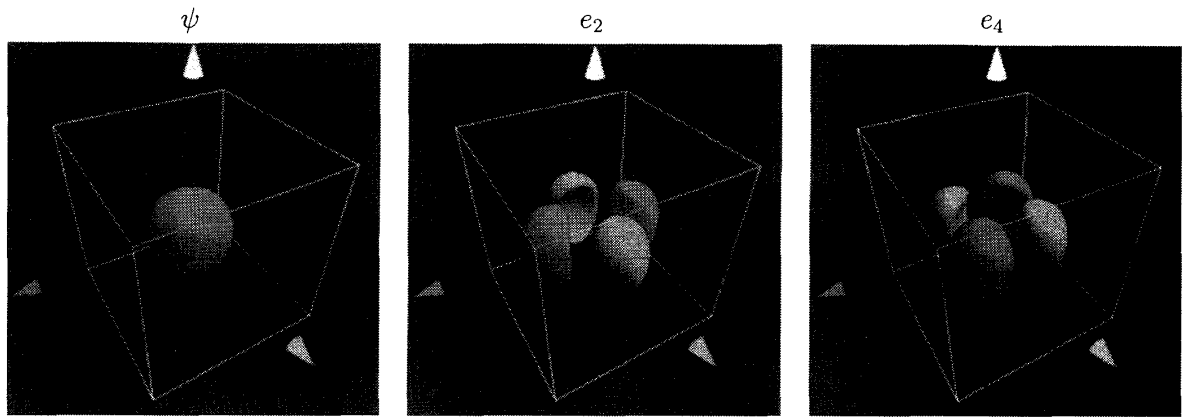


図 24: 赤矢印は x 方向、青矢印が y 方向、緑矢印が z 方向を意味する。十分時間を置いた後の ψ (左)と、 xy 面内の一軸伸長 e_2 (中央)、 xy 面内の剪断変形 e_4 (右) の等値面表示。左図では $\psi = 0$ 、中央図では $e_2 = \pm 0.04$ 、右図では $e_4 = \pm 0.03$ の等値面をプロットしている。赤い面が値が正の領域、青い面が負の領域を表す。

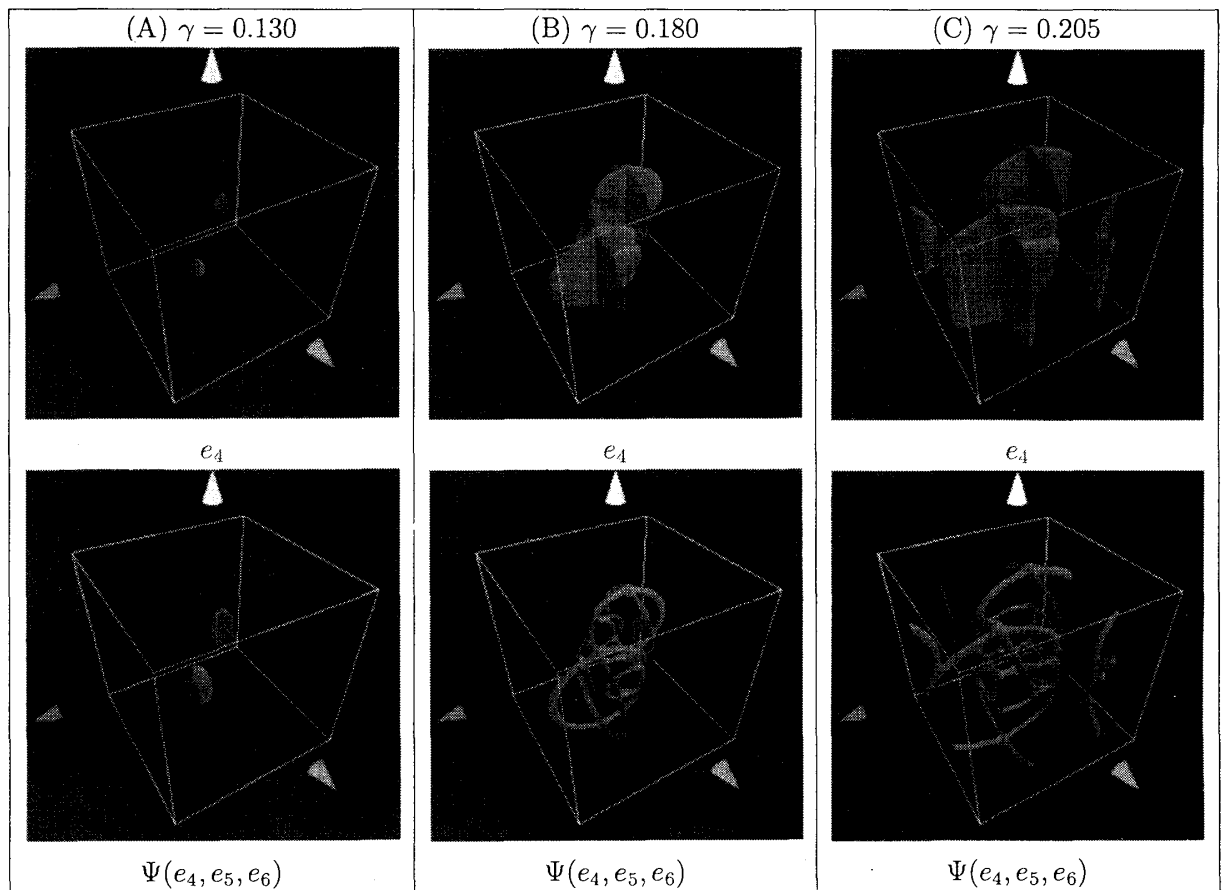


図 25: 図 21 の各 (A)(B)(C) での局所変形 e_4 と剪断弾性エネルギー $\Psi(e_4, e_5, e_6)$ の等値面表示。 e_4 は閾値 0.3 以上、 Ψ は 0.025 以上の範囲を赤い面で囲っている。

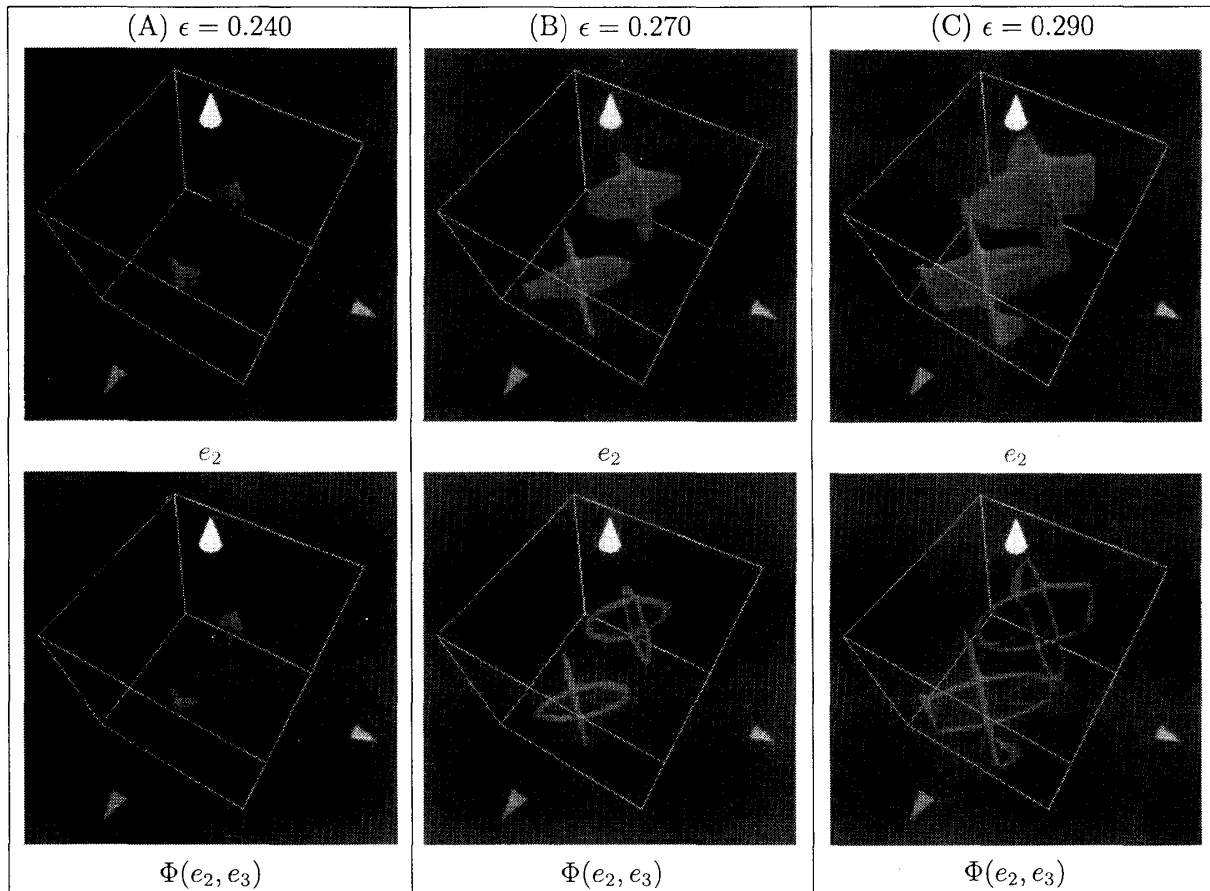


図 26: 図 21 の各 (A)(B)(C) での局所変形 e_2 と伸長弾性エネルギー $\Phi(e_2, e_3)$ の等値面表示。 e_2 は閾値 0.43 以上、 Φ は 0.022 以上の範囲を赤い面で囲っている。

6 まとめ

6.1 結論

本論文では粗視化された phase field model による塑性変形を主に 2 相金属で扱った。2 次元と 3 次元双方で計算を扱ったが、複雑な塑性変形に対する多くの知見が得られたと考えてもよい。幾つの特徴的な点を以下にまとめておく。

2 次元の自発的欠陥生成に関して

2 次元の合金に対して二段階の冷却を行うことで界面から転位が自発的に発生することが数値的に確認された。実験的には析出した体積比率の小さい γ' 相 (Al_3Sc) が 20nm を越えたときに転位が発生することが確認されている。このような自発的転位の生成は今まで理論的に研究されていなかった。

転位が発生する際、すべりは軟らかいネットワーク上の領域に優先的に発生し、界面付近でトラップされる。これは多くの観測と一致している。理論的には成分比に依存する弾性定数がこの実験結果を説明する重要な要因である。

外的変形に対する応答に関して

外的変形に対する応答に関しては主に2次元で計算を行った。初期条件では整合な2相状態の金属に対して外力を加えると多くのすべりが発生する。このようなすべりは主に一軸的に伸ばされた領域で最も歪みの大きい真中付近から発生することが多い。Stress-Strain curveは1相状態と2相状態では大きく異なる。実際の2相金属では外的変形に対する応答は降伏点がなく、単調な増加を示す。

3次元での転位の発生に関して

3次元で外的な変形を加えた場合、エネルギー的な要請から通常欠陥は線状を取り、それが境界部分まで伸びるかループを形成することでエネルギー的に低い状態を形成しようとする。当モデルでこのループ生成と、すべりが面状に発生する結果を出したが、これは実験的にも多くの観測結果がある。

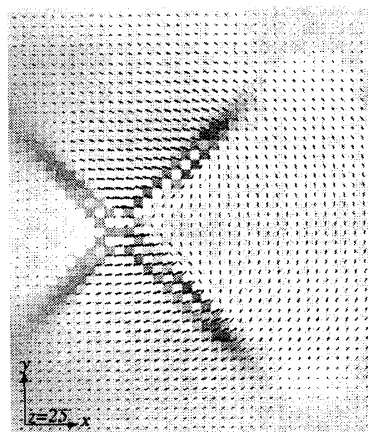


図 27: $\epsilon = 0.270$ 、 $z = 25$ での断面における伸長弾性エネルギーの濃淡プロットと、その面への変位の一様変形からのずれ $\delta \mathbf{u} = \mathbf{u} - \mathbf{u}_0$ を断面に射影したもの。右側あたりに球形のドメインがある。

6.2 謝辞

最後になりましたが、ここで感謝の意をこめてお世話になった方々の名前を挙げさせていただきます。小貫明先生には指導教官として基礎的な物事から御指導いただきました。また同期の小本真広氏には数値計算の技術からディスカッションまで多くのことを学ばせていただきました。その他挙げればきりがないのでまとめますが、研究室の皆様、秘書及び事務員の皆様による見えること見えないこと様々な協力があって研究することができました。また、私の家族や友人には直接研究に関わらない部分で研究生活を支えていただきました。ここでまとめて感謝致します。

参考文献

- [1] T. Miyazaki and M. Doi. *Mater. Sci. Eng*, 54:9, 1982.
- [2] W. L. Bragg and E. J. Williams. *Proc. Roy. Soc A*, 145:699, 1934.
- [3] J. W. Cahn. *Acta Metall.*, 32:1925, 1964.
- [4] A. Onuki and H. Nishimori. *Phys. Rev. B*, 43:1991, 13649.
- [5] H. Nishimori and A. Onuki. *J. Phys. Soc. Japan*, 60:1991, 1208.
- [6] A. Onuki and A. Furukawa. *Phys. Rev. Lett*, 86:452, 2001.
- [7] S.Y. Hu and L.Q. Chen. *Acta Mater.*, 49:463, 2001.
- [8] F. Léonard and R. Desai. *Phys. Rev. B*, 58:8277, 1988.

- [9] A. Minami and A. Onuki. *Phys. Rev. B*, 70:184114, 2004.
- [10] A. Onuki. *Phys. Rev. E*, 68:061502, 2003.
- [11] S.Y. Hu and L.Q. Chen. *Chen, Acta Mater.*, 49:463, 2002.
- [12] Y. Wang, D. J. Srolovitz, J. M. Rickman, and R. LeSar. *Acta Mater.*, 48:2163, 2000.
- [13] F. R. N. Nabarro. *Theory of Crystal Dislocations*. Clarendon Press, Oxford, England, 1967.
- [14] Y. U. Wang, Y. M. Jin, A. M. Cuitiño, and A. G. Khachatryan. *Acta Mater.*, 49:1847, 2001.